

University of Groningen

## The electronic structure of embedded transition metal atoms

Marel, Dirk van der

**IMPORTANT NOTE:** You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

*Document Version*

Publisher's PDF, also known as Version of record

*Publication date:*

1985

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

*Citation for published version (APA):*

Marel, D. V. D. (1985). *The electronic structure of embedded transition metal atoms*. s.n.

### Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

### Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

## SAMENVATTING

In de beschrijving van de toestandsdichtheid van metalen wordt meestal gebruik gemaakt van het onafhankelijke electronen model, waarbij men aanneemt dat de bewegingen van de electronen in de vaste stof niet gecorreleerd zijn en ieder electron slechts de gemiddelde potentiaal van de overige deeltjes voelt. In theorieën, waarbij men iets verder gaat en een complexe zelf-energie toevoegt aan de één-deeltjes energieën, beschouwt men de zogenaamde exchange-correlatie als een storingsterm, die tot eindige orde in een reeks ontwikkeling meegenomen wordt. Dit beeld is correct in het geval van één gat in een volle band of schil, één electron in een lege band of schil of in het geval van een electron of gat in een precies half-gevulde schil. Ook kan men dit model toepassen indien de wisselwerkingen verwaarloosbaar zijn ten opzichte van de bandbreedte voor een gedeeltelijk gevulde band. In het omgekeerde geval, waar de wisselwerkingen tussen de electronen juist groot zijn ten opzichte van de bandbreedte, is het beter de hybridizatie op te vatten als storingsparameter, terwijl men de electron-electron interacties "exact" meeneemt. Systemen waar dit het geval is hebben vaak interessante eigenschappen, zoals magnetisme, het Kondo effect, gemengde valentie en zware fermion eigenschappen.

In dit proefschrift worden (inverse) foto electron spectroscopische- en Auger experimenten beschreven aan systemen bestaande uit een overgangsmetaal atoom met een sterk gecorreleerde d-schil ingebed in een gastheer met een ongecorreleerde sp band en een gevulde d band. Het één gaten foto electron spectrum van de gastheer banden kan dus beschreven worden met behulp van het onafhankelijke electronen model. Als ingebed atoom werden eerst Pd en Pt onderzocht (hoofdstuk V), waar men een vrijwel gevulde d schil verwacht, zodat ook daar het onafhankelijke deeltjes model gebruikt kan worden voor de foto electron spectra. Deze spectra zijn nauw verwant aan de toestandsdichtheid, maar zijn gemoduleerd door optische matrix elementen. Door gebruik te maken van de foto electron spectroscopische informatie over het gastheer materiaal kan men de spectra van de verdunde legeringen precies berekenen (hoofdstuk III). De experimentele resultaten geven, via de theorie, informatie over sommige transport eigenschappen van de legeringen.

De volgende stap is atomen met halfgevulde d schillen te onderzoeken (Mn,

hoofdstuk VI). Het foto electron spectrum weerspiegelt nu de meerderheids spins en het inverse fotoelectron spectrum de minderheids spins. Ook nu kan men de theorie van hoofdstuk III gebruiken voor de interpretatie. De experimentele gegevens worden gebruikt om uitspraken te doen over de fysische grootheden met betrekking tot de Kondo- en spinglas eigenschappen. De combinatie van AES, UPS en BIS stelt ons tevens in staat om de Coulomb en exchange parameters binnen de d-schil van Mn te bepalen. Een belangrijke conclusie is, dat de exchange interactie zijn atomaire karakter niet verliest in de vaste stof. De electrostatische Coulomb interactie, daarentegen, is in de vaste stof veel kleiner dan in het atoom t.g.v. afscherming. In hoofdstuk II wordt dit gegeven uitgediept voor de d en f overgangsmetalen. Wij komen daar tot de opmerkelijke conclusie, dat de combinatie van afscherming en exchange in een aantal gevallen tot een attractieve wisselwerking tussen parallele spins kan leiden. Dit plaatst het "heavy fermion" probleem in een nieuw daglicht. Met behulp van kanonieke transformaties wordt in hoofdstuk VII aangetoond, dat een dergelijke interactie tussen gelocaliseerde electronen doorwerkt in de geleidings-electronen en kan leiden tot de vorming van triplet paren.